

A close-up photograph of a field of daisies. The flowers are in various stages of bloom, with bright yellow and orange petals and dark brown centers. The background is a soft, out-of-focus mix of blue and purple, suggesting a sky or distant landscape. The overall mood is warm and welcoming.

**Добро пожаловать!**

# **Тема 1 Виды движения в молекуле, типы молекулярных спектров**

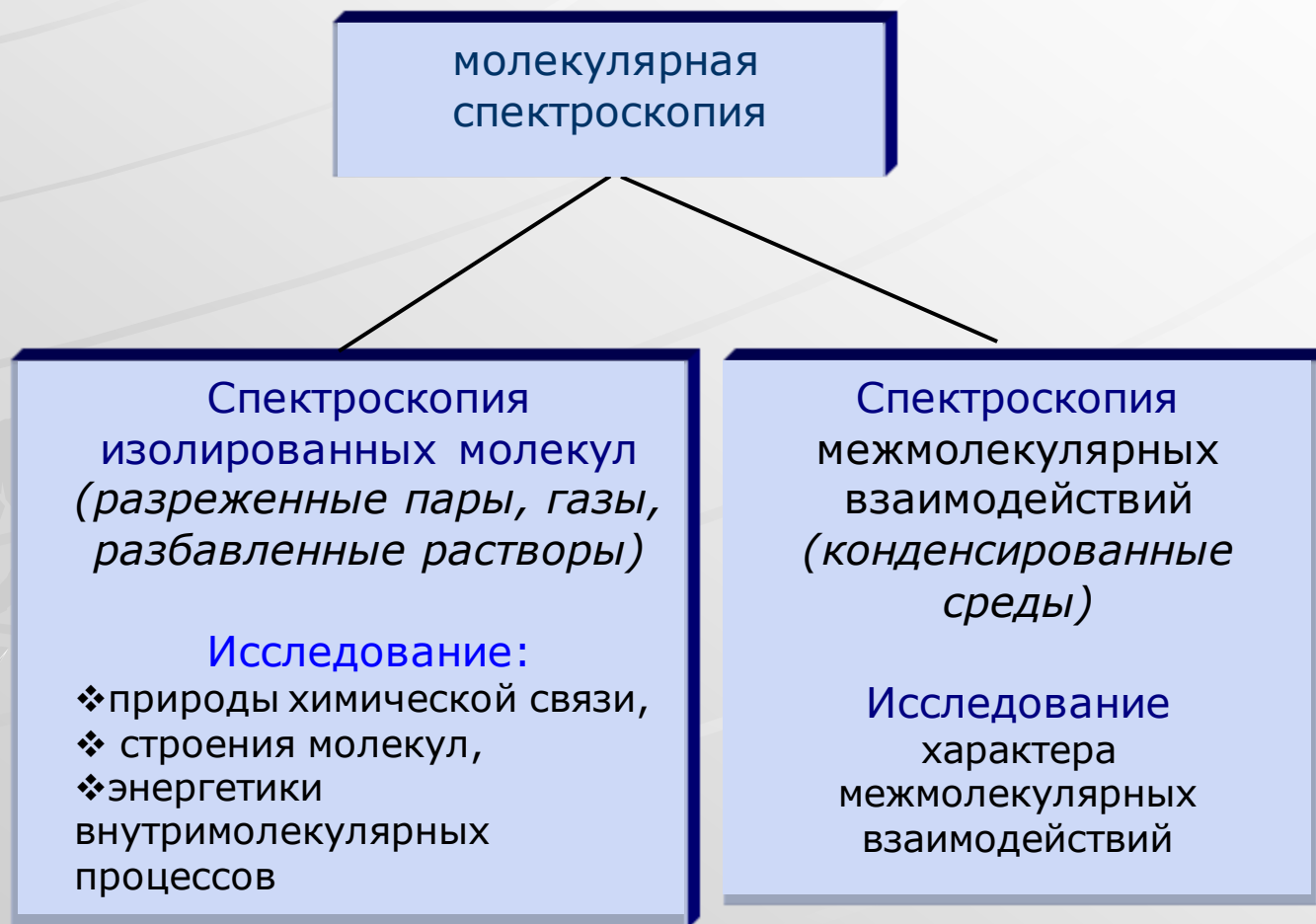
**1 Классификация молекулярных спектров**

**2 Адиабатическое приближение при описании молекулярных спектров**

**3 Уравнение Шрёдингера для молекулы**

**4 Сущность метода последовательных приближений при решении уравнения Шрёдингера для молекулы**

# 1 Классификация молекулярных спектров



## Общий вид уравнения Шрёдингера

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i + e^2 \sum_{i < j=1}^n \frac{e^2}{r_{ij}} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta_{\alpha}}{M_{\alpha}} + \sum_{\alpha < \beta=1}^N \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{\rho_{\alpha\beta}} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_{\alpha} e^2}{r_{\alpha i}}$$

виды  
движения  
молекулы

**Электронное**  
– это движение электронов  
молекулы относительно ее  
ядер

**Колебательное**  
– это периодическое  
изменение взаимного  
расположения ядер  
(межъядерных расстояний и  
валентных углов)

**Вращательное**  
– это периодическое  
изменение ориентации  
молекулы как целого в  
пространстве

## Число степеней свободы движения молекулы в системе центра инерции

	$P_j$	$P_v$	$P_e$
линейная молекула	2	$3N-5$	$3n$
нелинейная молекула	3	$3N-6$	$3n$

$$\hat{H}(x, \rho, \theta) = \hat{T}_e(x) + V(x, \rho) + \hat{T}_v(\rho) + \hat{T}_j(\theta, \rho)$$

$$\hat{T}_e(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i$$

$$\hat{T}_v(\rho) + \hat{T}_j(\theta, \rho) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta_\alpha}{M_\alpha}$$

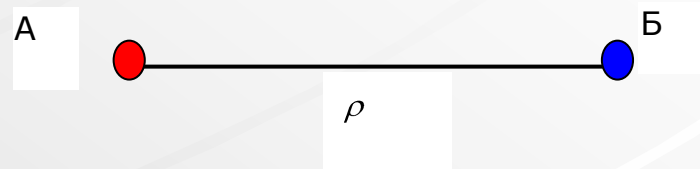
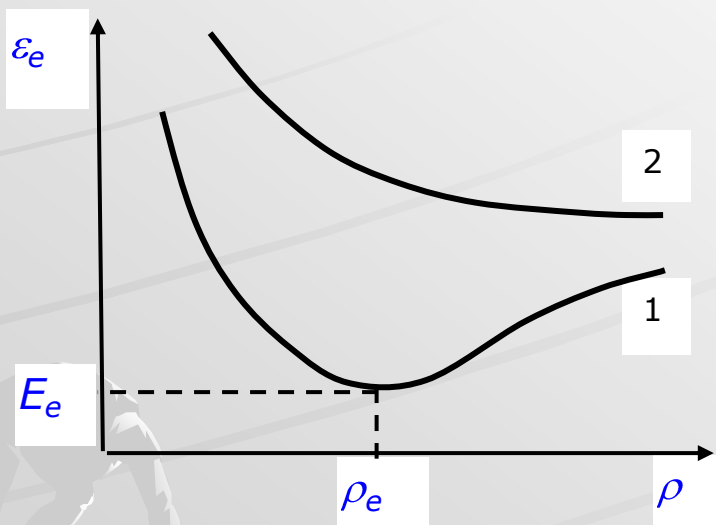
$$V(x, \rho) = \sum_{i < j=1}^n \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\alpha < \beta=1}^N \frac{z_\alpha z_\beta e^2}{\rho_{\alpha\beta}} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{z_\alpha e^2}{r_{\alpha i}}$$

$$\Psi(x, \rho, \theta) = \psi_e(x, \rho) \psi_v(\rho) \psi_j(\theta, \rho)$$

## Уравнение Шрёдингера для электронного движения молекулы

$$\hat{H}_e \Psi_e = \varepsilon_e \Psi_e$$

$$\hat{H}_e(x, \rho) = \hat{T}_e(x) + V(x, \rho)$$



1-устойчивое электронное состояние  
2-неустойчивое электронное состояние



## Уравнение Шрёдингера для колебательного движения молекулы

$$\hat{H}_v \psi_v = E_v \psi_v \longrightarrow E_v$$

$$\hat{H}_v = \hat{T}_e + \hat{V}_e + \hat{T}_v$$

## Уравнение Шрёдингера для вращательного движения молекулы

$$\hat{H}_J \psi_J = E_J \psi_J \longrightarrow E_J$$

$$E = E_e + E_v + E_J$$

$$E_e \gg E_v \gg E_J$$

$$\Delta E_e \gg \Delta E_v \gg \Delta E_J$$

Таблица 1. Области электромагнитного излучения

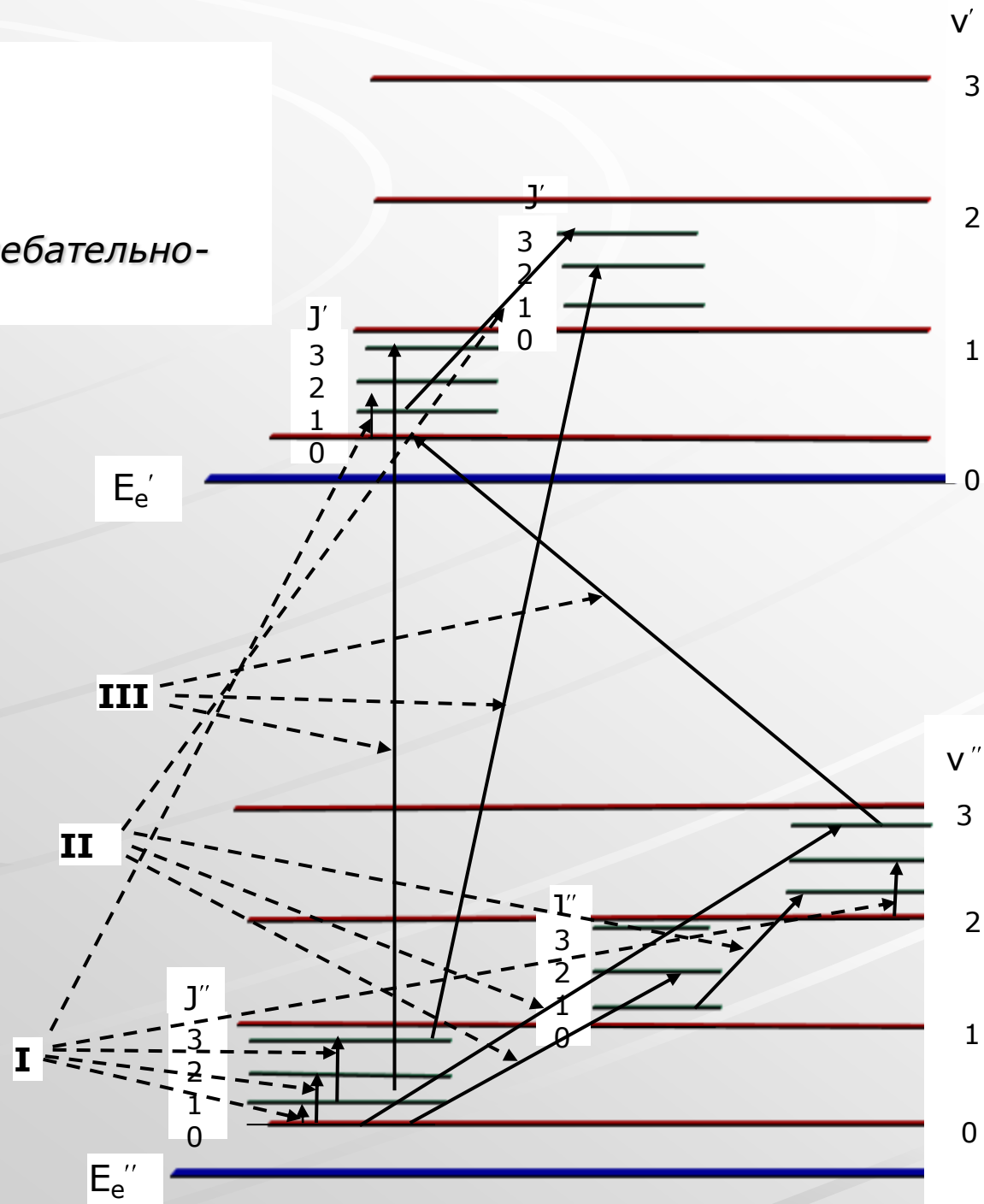
Область спектра	Длина волны $\lambda$ , см	Волновое число $\tilde{\nu}$ , см <sup>-1</sup>	Энергия E, кДж/моль	Молекулярная причина поглощения
Радиоволны ↑				
Микроволновая	$10 - 10^1$	$10^1 - 10$	0.0012 – 0.12	Вращение молекул
ИК дальняя	$10^1 - 5 \cdot 10^3$	10 – 200	0.12 – 2.4	
ИК средняя	$5 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$	200 – 5000	2.4 – 60	Колебания ядер и атомов в молекуле
ИК ближняя	$2 \cdot 10^4 - 0.76 \cdot 10^4$	5000 – 13000	60 – 155	
Видимая	$0.76 \cdot 10^4 - 0.4 \cdot 10^4$	$1.3 \cdot 10^4 - 2.5 \cdot 10^4$	155 – 300	Переходы валентных эл-нов
УФ ближняя	$0.4 \cdot 10^4 - 0.2 \cdot 10^4$	$3.5 \cdot 10^4 - 5 \cdot 10^4$	300 – 598	
УФ дальняя	$0.2 \cdot 10^4 - 10^6$	$5 \cdot 10^4 - 10^6$	598 – 12000	
↓ Рентгеновское и $\gamma$ -излучение				

## Переходы

*I* – вращательные;

*II* – колебательно-вращательные;

*III* – электронно-колебательно-вращательные





The background of the image is a lush, out-of-focus field of green plants with delicate, feathery leaves and small, light pink flowers. The text is centered over this natural scene.

Желаю успехов!